

CONTENTS

ORIGINAL SCIENTIFIC PAPERS

GENERAL AND THEORETICAL CHEMISTRY

K. Furić: Depolarization Ratio ρ_{\perp} ($\pi/2$) of Raman Bands for Dissolved and Molten Benzoic Acid Dimers	1
N. Pavković, B. Kojić-Prodić, M. Marković and D. Plavšić: Precipitation and Characterization of Strontium Phosphates	7
Ž. Kurtanek: Mathematical Model of the Oscillatory Oxidation of Hydrogen on Nickel	17
T. P. Živković: Molecular Orbital Resonance Theory: Matrix Elements of One-particle Operators	29
H. Bilinski and N. Brnićević: Precipitation and Complex Formation of Zirconium(IV) with Malonic, Succinic and Adipic Acids at 298 K	53
M. Biruš, Z. Bradić, N. Kujundžić, and M. Pribanić: Kinetics and Mechanism of Interactions Between Iron(III) and Desferrioxamine B. The Formation and Hydrolysis of Ferrioxamine B in Acid Aqueous Solution	61
N. Raos and V. Simeon: Conformational Analysis of Bis-(<i>N,N</i> -dimethylvalinato)copper(II): a Possible Explanation of the Enantioselectivity Effect	79
B. Kamenar, D. Matković, and A. Nagl: Crystal and Molecular Structure of Two (Phenylsulfonyl)-3-(hexahydroazepin-1-yl)-ureas: (A) 1-(4-Chlorophenyl)-3-(hexahydro-1 <i>H</i> -azepin-1-yl)-rea and (B) 1-(4-Methylphenylsulfonyl)-3-(hexahydro-1 <i>H</i> -azepin-1-yl)-urea	87
V. Verma, S. Kher, and R. N. Kappor: Reactions of Hafnium Tetrachloride with Benzoyl Hydrazones	97
Him-Tai Tsang and Wai-Kee Li: MINDO/3 Study of Cyclopentadienylidene and Its Insertion into Molecular Hydrogen	103
J. J. Aaron, A. Tine, C. Villiers, C. Párkányi, and D. Bouin: Electronic Absorption and Fluorescence Spectra of Indole Derivatives. Quantitative Treatment of the Substituent Effects and a Theoretical Study	157
J. Bertán, J. Anguiano and A. Oliva: The Electrophile Desolvation Process in Nucleophile-Electrophile Combination Reactions	169
N. Bodor, A. J. Harget, and E. Phillips: Structure-Activity Relationships in the Antiinflammatory Steroids: A Pattern Recognition Approach	175
G. Frenking and H. Schawrz: SCF-Calculations as Tool to Interpret Reaction Pathes — The Cases of CO ₂ Loss from Ionized ClCH ₂ —COOCH ₃ and C ₂ H ₄ Loss from Ionized (CH ₃) ₂ N—COCH ₂ X	185
A. Furka: An Empirical Formula Expressing the Mutual Dependence of C—C Bond Distances	191
A. Furka: Comparison of the Heats of Formation of Hydrocarbons	199
P. Ilić and N. Trinajstić: Structural Normalization of Topological Resonance Energy	203
A. Jurić and N. Trinajstić: Topological Resonance Energies of Thiocoumarins	215
E. C. Kirby: The Use of a Micro-Computer as an Aid to Theoretical Calculations	221
G. Marconi and G. Orlandi: Vibronic Coupling in Carbonyl Compounds	225
Ov. Mekenyan, D. Bonchev, and N. Trinajstić: Structural Complexity and Molecular Properties of Cyclic Systems with Acyclic Branches	237
M. Mintas, K. Jakopčević, and L. Klasine: Photoelectron Spectroscopy of Some trans-2,2'-Disubstituted Stilbenes	263
U. Norinder, D. Tanner, and O. Wennerström: Dianions from Cyclophanes with Unsaturated Bridges; Cyclic Conjunction in 22—38 π -Electron Perimeter Systems	269

I. Novak, L. Klasinc, G. Karminski-Zamola, and K. Jakopčič: Photoelectron Spectroscopy of Heterocycles. 1-(2-Furyl)-2-arylethenes	281
P. R. Surján: Conformation Analysis in Ligth of Localization and Delocalization	289
H. Vogler: On the Existence of Biradical-Ionic States of Donor-Acceptor Cyclophanes. A Simple MO-Theoretical Study	297
A. L. Goodson: Application of Graph-Based Chemical Nomenclature to Theoretical and Preparative Chemistry	315
A. Graovac, O. E. Polansky, and N. N. Tyutyulkov: Acyclic and Characteristic Polynomial of Regular Conjugated Polymers and Their Derivatives	325
K.-D. Gundermann, C. Lohberger and, M. Zander: New Topological Indices for Alternant Polycyclic Aromatic Hydrocarbons	357
I. Gutman: Topological Properties of Benzenoid Systems. XXI. Theorems, Conjectures Unsolved Problems	365
J. Henđeković: Variational Approach to Diabatic States	375
D. Juretić: The Thermodynamic and Kinetic Limits on the Process of Free Energy Storage by Photosynthetic Systems	383
P. Karafiloglou: Perturbational Self-Consistent Orbitals for Open-Shell Systems. An Application to Xylylenes	389
M. Klessinger: The Fragments-in-Molecules Method. III. Inductive and Mesomeric Effects	397
J. V. Knop, W. R. Müller, K. Szymanski, M. Randić i N. Trinajstić: Note on Acyclic Structures and their Self-Returning Walks	405
J. V. Knop, D. Plavšić, M. Randić, and N. Trinajstić: Chemical Graph Theory. V. On the Classification of Topological Biradicals	411
J. V. Knop, K. Szymanski, G. Jashari, and N. Trinajstić: The Connection Between the Adjacency Matrix and the Boundary Code of Benzenoid Hydrocarbons	443
J. Koutecký, D. Plavšić, and D. Döhnert: Topological Properties on Small Li Clusters and the Pariser-Parr-Pople-Type Model	451
Z. B. Maksić and K. Rupnik: Point-charge Description of some Molecular Properties	461
R. B. Mallion: An Analytical Illustration of the Relevance of Molecular Topology to the Aufbau Process	477
A. Moyano and J. C. Paniagua: Topological Localized Molecular Orbitals of Hückel and Möbius Annulenes	491
J. C. Paniagua and A. Moyano: On the Relationship Between Localized Molecular Orbitals and Kekulé Structures	499
G. Winkelhofer, R. Janoschek, F. Fratev, and P. v. R. Schleyer: Acetylene, Vinylidene, and the Vinyl Cation in Ground and Excited States	509
T. P. Živković: Molecular Orbital Resonance Theory: A Simple Model and the Generalized Hückel Rule	525
A. R. Despić: Electrochemistry/Colloid Chemistry Interaction: (a) Effect of Particle size on Electrokinetic Phenomena and Coagulation: (b) Anodic Deposition of Colloidal Metal	553
F. M. Etzler and W. Drost-Hansen: Recent Thermodynamic Data on Vicinal Water and a Model for their Interpretation	563
W. Stumm, G. Furrer, and B. Kunz: The Role of Surface Coordination in Precipitation and Dissolution of Mineral Phases	593
E. Tipping, J. R. Griffith, and J. Hilton: The Effect of Adsorbed Humic Substances on the Uptake of Copper(II) by Goethite	613
B. Vincent: Weak, Reversible Flocculation Phenomenon in Sterically-stabilised Dispersions	623
A. C. Zettlemoyer, P. Pendleton, and F. J. Micale: A Study of the Mechanism of Micropore Filling. I. Molecular Sieve Effects	633
E. Matijević and N. Kallay: Kinetics of Deposition of Colloidal Metal Oxide Particles on a Steel Surface	649
B. R. Jennings and R. C. Fairwood: Electric Birefringence and Electrophoretic Ligth Scattering for Colloid Stability Characterization	663
E. Killmann: The Stability of Silica Hydrosols Under the Influence of Polymer Adsorption	673
B. C. Bonekamp, H. A. van der Schee, and J. Lyklema: Adsorption of Oligo- and Polypeptides as Model Polyelectrolytes	695

W. Norde: The Role of Charged Groups in the Adsorption of Proteins at Solid Surfaces	705
--	-----

ANALYTICAL CHEMISTRY

Rajeev Jain: Polarographic Investigations of Some 2-Arylazo-2-bromo-5,5-dimethylcyclohexane-1,3-diones	117
--	-----

ORGANIC SYNTHESIS

V. Škarić and M. Jokić: Homologation and Intramolecular Cyclisation Reactions in Aliphatic Deoxyuridine Analogues Series	125
M. Kovačević, J. J. Herak, and B. Gašpert: Activation of the Carboxylic Acids by Anhydride Formation with <i>N</i> -Acyl- <i>N</i> -Alkyl Carbamic Acid	141

BIOCHEMISTRY

H. Füredi-Milhofer: Precipitation and Interfacial Phenomena in Biological Mineralization. Introductory Remarks	721
G. H. Nancollas: The Mechanisms of Precipitation of Biological Minerals. The Phosphates, Oxalates and Carbonates of Calcium	741
J. L. Meyer: Phase Transformation in the Spontaneous Precipitation of Calcium Phosphate	753
J. Christoffersen, M. R. Christoffersen, and J. Arends: Dissolution of Calcium Hydroxylapatite and its Application to Biological Demineralization	769
W. E. Brown, L. C. Chow, and M. Mathew: Thermodynamics of Hydroxyapatite Surfaces	779
J. Kratochvil, T. M. Aminabhavi, W. P. Hsu, S. Fujime, and B. Chu: Osmometric Properties of Micelles of Dihydroxy Bile Salts: Sodium Taurodeoxycholate and Sodium Glycodeoxycholate	789
D. Bratko, J. Cerkovnik, J. Špan, and G. Vesnaver: Osmometric Study of Aggregation in Dye Solutions	797
H. H. Trimm and B. R. Jennings: The Study of Cartilage Proteoglycan Interactions by Electric Birefringence	803
P. G. Neeson, B. R. Jennings, and G. J. T. Tiddy: An Electric Birefringence Study of Aqueous Tetraethyleneglycol Dodecyl Ether Micelles	809

NOTES

ANALYTICAL CHEMISTRY

D. Doběnik: Die potentiometrische Fällungstitrationen mit der Glaselektrode. Elektroanalytische Endpunktsbestimmung im System $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2\text{--K}_2\text{CrO}_4$..	113
---	-----

APPENDIX

Book Reviews (in Croatian)	A1
Minutes of the Meeting of the Croatian Chemical Society (in Croatian)	A7
Obituary	C1
Announcements	C3, C5
Acknowledgement to Referees	C9
Errata	C10
Contents: <i>Croatica Chemica Acta</i> , Vol. 56	XIII

SADRŽAJ

ORIGINALNI ZNANSTVENI RADOVI

OPĆA I ANORGANSKA KEMIJA

K. Furić: Omjer depolarizacije q_{\perp} ($\pi/2$) Ramanovih vrpca dimera benzojeve kiseline u otopinama i talini	1
N. Pavković, B. Kojić-Prodić, M. Marković i D. Plavšić: Taloženje i karakterizacija stroncij-fosfata	7
Z. Kurtanjek: Oscilatorna stanja pri oksidaciji vodika na niklu	17
T. P. Živković: Novi semiempirijski pristup proračunu elektronske strukture π -elektronskih sustava. I Matrični elementi	29
H. Bilinski i N. Brničević: Taloženje i stvaranje kompleksa cirkonija(IV) s malonskom, jantarnom i adipinskom kiselinom, kod 298 K	53
M. Biruš, Z. Bradić, N. Kujundžić i M. Pribanić: Kinetika i mehanizam kompleksacije željezo(III)-iona sa desferioksaminom B. Nastajanje i hidroliza ferioksamina B u kiseljoj vodenoj otopini	61
N. Raos i V. Simeon: Konformacijska analiza bis-(N,N-dimetilvalinato)bakra (II): objašnjenje enantioselektivnog učinka	79
B. Kamenar, D. Matković i A. Nagl: Kristalna i molekulska struktura dviju (fenilsulfonyl)-3-(heksahidroazepin-1-il)-urea: (A) 1-(4-klorfenilsulfonyl)-3-(heksahidro-1H-azepin-1-il)-urea i (B) 1-(4-metilfenilsulfonyl)-2-(heksahidro-1H-azepin-1-il)-urea	87
V. Verma, S. Kher i R. N. Kapoor: Reakcije hafnij(IV)-klorida sa benzoilhidrazonima	97
Him-Taj Tsang i Wai-Kee Li: MINDO/3 studij ciklopentadienilidena i njegovog umetanja u molekulski vodik	103
J. J. Aaron, A. Tine, C. Villiers, C. Párkányi i D. Bouin: Elektronski apsorpcijski i fluorescencijski spektri indolnih derivata. Kvantitativna obradba utjecaja supstituenata i teorijsko razmatranje	157
J. Bertrán, J. Anguiano i A. Oliva: Proces desolvatacije elektrofila u reakcijama kombinacije nukleofil-elektrofil	169
N. Bodor, A. J. Harget i E. Phillips: Odnos strukture i aktivnosti u antiupalnim steroidima: Pristup prepoznavanjem obrasca	175
G. Frenking i H. Schwarz: SCF-proračuni kao sredstva za interpretaciju reakcijskih mehanizama — slučajevi otpuštanja CO_2 iz ioniziranog $\text{CICH}_2\text{—COOCH}_3$ i C_2H_4 iz ioniziranog $(\text{CH}_3)_2\text{N—COCH}_2\text{X}$	185
A. Furka: Empirijska formula koja prikazuje međusobnu ovisnost duljine C—C veza	191
A. Furka: Usporedba toplina stvaranja ugljikovodika	199
P. Ilić i N. Trinajstić: Strukturalno normiranje topologijske rezonancijske energije	203
A. Jurić i N. Trinajstić: Topologijske rezonancijske energije tiokumarina	215
A. C. Kirby: Upotreba mikrokomputera kao pomagala u teorijskim računima	221
G. Marconi i G. Orlandi: Vibransko sprezanje u karbonilnim spojevima	225
Ov. Mekenyan, D. Bonchev i N. Trinajstić: Strukturna sastavljenost i molekularna svojstva cikličkih sistema s acikličkim ograncima	237
M. Mintas, K. Jakopčić i L. Klasinc: Fotoelektronski spektri nekih trans-2,2'-disupstituiranih stilbena	263
U. Norinder, D. Tanner i W. Wennerström: Dianioni ciklofana s nezasićenim mostovima; ciklička konjugacija u sistemima s 22—38 π -elektrona na perimetru	269

I. Novak, L. Klasinc, G. Karminski-Zamola i K. Jakopčić: Fotoelektronska spektroskopija heterocikličkih spojeva. 1-(2-furil)-2-arileteni	281
P. R. Surján: Konformacijska analiza s aspekta lokalizacije i delokalizacije	289
H. Vogler: O postojanju biradikal-ionskih stanja donor-akceptor ciglofana. Jednostavna MO-teorijska studija	297
A. L. Goodson: Primjena kemijske nomenklature zasnovane na grafovima u teorijskoj i preparativnoj kemiji	315
A. Graovac, O. E. Polansky i N. N. Tyutyulkov: Aciklički i karakteristični polinom regularnih konjugiranih polimera i njegovih derivata	325
K.-D. Gundermann, C. Lohberger i M. Zander: Novi topološki indeksi za alternantne policikličke aromatske ugljikovodike	357
I. Gutman: Topološka svojstva benzenoidnih sustava. XXI. Teoremi, hipoteze, neriješeni problemi	365
J. Hendeković: Varijacijski pristup dijabatskim stanjima	375
D. Juretić: Termodinamička i kinetička ograničenja u procesu pohranjivanja slobodne energije kod fotosintetskih sistema	383
P. Karafiloglou: Perturbacijske samousklađene orbitale za sisteme s otvorenim ljuskom. Primjena za ksililene	389
M. Klessinger: Metoda molekularnih fragmenata. III. Induktivni i mezomerni efekti	397
J. V. Knop, W. M. Müller, K. Szymanski, M. Randić i N. Trinajstić: Bilješke o acikličkim strukturama i njihovim samovraćajućim šetnjama	405
J. V. Knop, D. Plavšić, M. Randić i N. Trinajstić: Kemijska teorija crteža. V. O klasifikaciji topologijskih biradikala	411
J. V. Knop, K. Szymanski, G. Jashari i N. Trinajstić: Odnos između matrice susjedstva i rubnog koda benzenoidnih ugljikovodika	443
J. Koutecký, D. Plavšić i D. Döhnert: Topološka svojstva i model Pariser-Parr-Pople tipa za male Li klastere	451
Z. B. Maksić i K. Rupnik: Opis nekih molekularnih svojstava pomoću točkastih naboja	461
R. B. Mallion: Analitička ilustracija značaja molekularne topologije u Aufbau procesu	477
A. Moyano i J. C. Paniagua: Topološke lokalizirane molekularne orbitale Hückelovih i Möbiusovih anulena	491
J. C. Paniagua i A. Moyano: O vezi lokaliziranih molekularnih orbitala s Kekuléovim indeksom	499
G. Winkelhofer, R. Janoschek, F. Frattem i P. v. R. Schleyer: Acetilen, viniliden i vinil kation u osnovnom i pobuđenim stanjima	509
T. P. Živković: Molekulsko-orbitalna rezonancijska teorija: jednostavan model i poopćeno Hückelovo pravilo	525
A. R. Despić: Međuovisnost elektrohemije i koloidne hemije	553
F. M. Etzler i W. Drost-Hansen: Novi termodinamički podaci o vicinalnoj vodi sa modelom za njihovu interpretaciju	563
W. Stumm, G. Furrer i B. Kunz: Uloga površinske koordinacije pri taloženju i otapanju mineralnih faza	593
E. Tipping, J. R. Griffith i J. Hilton: Efekt adsorpcije humusnih tvari na vezivanje bakra(II) s getitom	613
B. Vincent: Fenomeni slabe interakcije i reverzibilne flokulacije u sterički stabiliziranim disperzijama	623
A. C. Zettlemoyer, P. Pendleton i F. J. Micale: Istraživanja mehanizma zapunjanja mikropora. I. Efekti molekulskih sita	633
E. Matijević i N. Kallay: Kinetika prijanjanja koloidnih čestica metalnih oksida na površinu čelika	649
B. R. Jennings i R. C. Fairwood: Električki dvolom i elektroforetsko raspršenje svjetla kao karakterizacija koloidne stabilnosti	663
E. Killmann: Stabilnost hidrosolova SiO ₂ pod utjecajem adsorpcije polimera	673
B. C. Bonekamp, H. A. van der Schee i J. Lyklema: Adsorpcija oligo- i polipeptida kao modela za polielektrolite	695
W. Norde: Utjecaj nabijenih skupina na adsorpciju proteina na čvrstim površinama	705

ANALITIČKA KEMIJA

Rajeev Jain: Polarografsko ispitivanje nekih 2-arilazo-2-2-brom-5,5-dimetil-cikloheksan-1,3-diona	117
---	-----

ORGANSKA SINTEZA

V. Skarić i M. Jokić: Homologizacija i intramolekularne ciklizacije u seriji alifatskih analoga deoksiuridina	125
M. Kovačević, J. J. Herak i B. Gašpert: Aktiviranje karboksilnih kiselina s pomoću mješovitog anhidrida s N-acil-N-alkil karbaminskom kiselinom	141

BIOKEMIJA

H. Füredi-Milhofer: Taloženje i međufazne pojave u biološkoj mineralizaciji. Uvodne napomene	721
G. H. Nancollas: Mehanizam taloženja bioloških minerala. Fosfati, oksalati i karbonati kalcija	741
J. L. Meyer: Fazna pretvorba pri spontanom taloženju kalcij-fosfata	753
J. Christoffersen, M. R. Christofferesen i J. Arends: Studija otapanja kalcij-hidroksiapatita i njegova primjena na biološku demineralizaciju	769
W. E. Brown, L. C. Chow i M. Mathew: Termodinamika površina hidroksiapatita	779
J. Kratochvil, T. M. Aminabhavi, W. P. Hsu, S. Fujima, A. Patkowski, F. C. Chen i B. Chu: Hidrodinamička svojstva micela dihidroksižučnih kiselina: Natrijev taurodeoksiholat i natrijev glikodeoksiholat	789
D. Brajko, J. Cerkvjenik, J. Špan i G. Vesnaver: Osmometrična raziskava agregacije v raztopinah barvih	797
H. H. Trimm i B. R. Jennings: Proučavanje interakcije hrskavičnih proteoglikana s pomoću električnog dvoloma	803
P. G. Neeson, B. R. Jennings i G. J. T. Tiddy: Proučavanje tetraetilenglikol-dodecileterskih micela u vodenom mediju s pomoću električnog dvoloma	809

BILJEŠKE

ANALITIČKA KEMIJA

D. Dobčnik: Potenciometrijska taložna titracija uz staklenu elektrodu — Elektroanalitičko određivanje završne točke titracije u sustavu $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2 - \text{K}_2\text{CrO}_4$	113
---	-----

PRILOZI

Prikazi knjiga	A1
Godišnja skupština Hrvatskoga kemijskog društva	A7
Nekrolog	C1
Obavijesti	C3, C5
Zahvala recenzentima	C9
Errata	C10
Sadržaj <i>Croatica Chemica Acta</i> , vol. 56	XIII

